



TITLE:

統計力学(III)(講義ノート)

AUTHOR(S):

橋爪, 夏樹

CITATION:

橋爪, 夏樹. 統計力学(III)(講義ノート). 物性研究 1966, 5(6): 389-400

ISSUE DATE:

1966-03-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/85870>

RIGHT:

統 計 力 学 (III)

橋 爪 夏 樹 (お茶の水女子大理)

IV. Kinetic Approach and Kubo Formulae

この章では hydrodynamical stage で、Introduction に注意した damping と fluctuation が正しくバランスされて含まれていることの保証の一つとして、Kubo formulae が如何にして得られるかを見よう。Kubo formulae には二種類ある。Mechanical disturbance に対する式の場合には、ハミルトニアンに外場のポテンシャルの項を附加えることができるから議論はそう面倒ではない。Thermal disturbance に対する式の場合には、ハミルトニアンは同一であつて、local equilibrium を通じて種々の熱力学的力が生ずるから、議論が複雑となる。この章では後の場合を議論することにする。拡散流、熱流などの定義や local equilibrium 分布の導入に伴なう複雑化を避けるために、前章で得た多体系に対する master equation を使うことをやめ、古典力学に従う理想化されたモデルについて議論することにする。

Note この章の議論は N. Hashitsume-S. Fujita: J. math. Phys. 5 (1964) 1572 による。

§ 11 Reduced Kinetic Equations

Hydrodynamical stage の議論をする普通の方法では、master equation を reduce して、 n 体分布 ($n=1, 2, 3, \dots$) の階級制度を作り、一体分布の満す Boltzmann 方程式の一般化である kinetic equation から流体力学方程式を導く。古典論では、一様な系の場合にはこの種々議論は一応完成しているが、thermal disturbance の議論に必要な一様でない系の場合には未完成である。量子論の場合、密度行列を reduce して行かねばならな

橋爪夏樹

いが、空間的に一様でない系については一般的な議論はない。この reduction という面倒な問題を避けるため、一個の古典的な quasi-particle が（半導体中の自由電子か空孔のように at random に分散した不純物などによる） static potentials によつて散乱されるという簡単なモデルを考えることにする。Reduction は散乱中心の配置について平均するという手続きとして現われる。

一粒子問題であるから、ハミルトニアンは次の形である：

$$\mathcal{H}(r, p) = \frac{p^2}{2m} + U(r). \quad (11.1)$$

ここにポテンシャル $U(r)$ は位置 $(\alpha=1, 2, \dots, N_S)$ に中心をもつポテンシャルの和として与えられる：

$$U(r) = \sum_{\alpha=1}^{N_S} \phi(r - R_\alpha). \quad (11.2)$$

系を記述する力学変数は粒子の座標 r と運動量の他に散乱中心の座標 R_1, R_2, \dots, R_{N_S} がある。散乱中心の運動量は、静止しているとして、落した。系の分布関数はこれらの力学変数の関数であるが、散乱中心の座標は書かず、 $f(r, p, t)$ と記す。これは Liouville 方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -i(\mathcal{L}_0 + \lambda \mathcal{L}_1)f; \quad \mathcal{L}_0 \equiv -i\mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}, \quad \mathcal{L}_1 \equiv i \frac{\partial U(r)}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}, \quad (11.3)$$

を満たす。 $\mathbf{v} \equiv \mathbf{p}/m$ は速度。 \mathcal{L}_0 を対角化するため波数ベクトル表示に移る：

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}, t), \quad \hat{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t); \quad (11.4)$$

$$\langle \mathbf{k} | \mathcal{L}_0 | \mathbf{k}' \rangle = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \quad \langle \mathbf{k} | \mathcal{L}_1 | \mathbf{k}' \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\alpha=1}^{N_S} e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_\alpha}.$$

$$\tilde{\phi}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = (\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}. \quad (11.5)$$

$\tilde{\phi}(\mathbf{k}) \equiv \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ で $\tilde{u}(0) \equiv 0$ とする。Liouville 方程式 (11.3) の解はこの表示で、

$$f_k(p, t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} dz e^{-izt} \sum_{k'} \langle k | \frac{1}{\mathcal{L} - z} | k' \rangle f_{k'}(p, 0), \quad (11.6)$$

$$\therefore \left(\frac{\partial}{\partial t} + ik \cdot v \right) f_k(p, t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} dz e^{-izt} i \sum_{k'} \langle k | (-\lambda \mathcal{L}_1) \frac{1}{\mathcal{L} - z} | k' \rangle f_{k'}(p, 0). \quad (11.7)$$

一体分布関数に当る量は $f(r, p, t)$ を散乱中心の配置に関して平均したものの $\overline{f(r, p, t)}$ である。これは粒子の座標および運動のみの関数である力学量の期待値を計算するのに使える。例えば粒子の拡散流は次式で与えられる：

$$\begin{aligned} j(r, t) &= \int v f(r, p, t) dp, \quad j_k(t) = \frac{1}{V} \int j(r, t) e^{-ik \cdot r} dr \\ &= \int v \overline{f_k(p, t)} dp. \end{aligned} \quad (11.8)$$

二体分布に相当する量は散乱中心の座標一個を残して、他の散乱中心の配置について f を平均した量であるが、以下では熱流

$$q(r, t) = \int w f(r, p, t) dp, \quad w \equiv v \left\{ \frac{p^2}{2m} + \lambda U(r) \right\} \quad (11.9)$$

のみを必要とするから、次の量で十分である：

$$q_{l,k}(p, t) \equiv \overline{\sum_{\alpha=1}^{N_S} e^{il \cdot R_{\alpha}} f_{k+l}(p, t)}, \quad (11.10)$$

$$\therefore q_k(t) \equiv \frac{1}{V} \int q(r, t) e^{-ik \cdot r} dr = \int v \left\{ \frac{p^2}{2m} \overline{f_k(p, t)} + \sum_l \frac{\lambda \tilde{\phi}(l)}{V} q_{l,k}(p, t) \right\} dp. \quad (11.11)$$

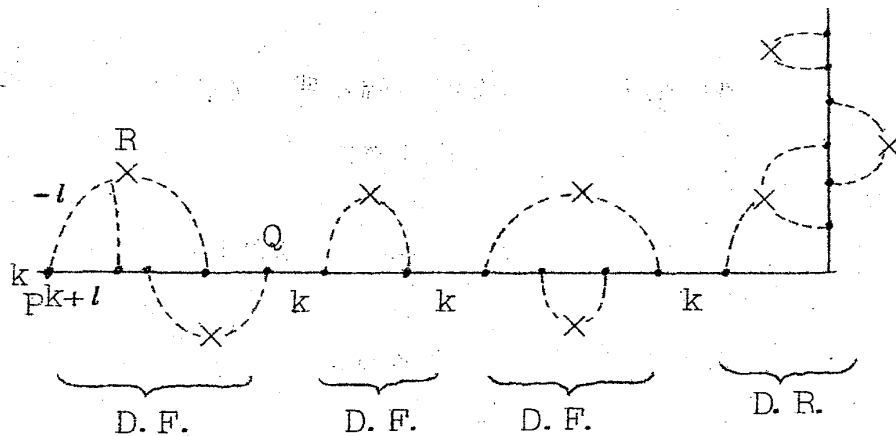
かくして $\overline{f_k(p, t)}$ および $q_{l,k}(p, t)$ の満す kinetic equations を求めることが問題となる。この問題は前節で展開した diagram technique を応用して容易に解ける。

(11.6) 或は (11.7) の右辺の resolvent $(\mathcal{L} - z)^{-1}$ を摂動展開し、propagator $(\mathcal{L}_0 - z)^{-1}$ の波数ベクトル表示 $(k \cdot v - z)^{-1}$ には line \xrightarrow{k} を対応させ、 $-\lambda \mathcal{L}_1$ の行列要素 (11.5) には vertex $k \xrightarrow{\times k-k'} k'$ を対応させる。

橋爪夏樹

Vertex から出る点線は外場を表わし、その端点 \times は散乱中心の位置を示す。このようにして摂動展開の各項に対応する diagram が定まれば、散乱中心の配置に関して平均をとれる。各 R_α ($\alpha=1, 2, \dots, N_S$) は互に独立に系の体積 V 上で一様分布をすると仮定すると、平均操作は、Edwards が示したように点線の端点を結び合わせ、かくして得られた端点 (何本かの点線が出ている) に出入する点線の波数ベクトルの総和が 0 になるようにすることである。一本しか出ない端点は仮定 $\tilde{\phi}(0)=0$ によつて許されない。

先ず (11.7) の平均を考える。右辺の摂動展開の各項に対応する diagram の典型的なものは才 3 図の形である。右端の縦線は初期分布 $f_k(p, 0)$ を象徴している。初期分布も一般に散乱中心に依存し得るから、縦線からも点線が出



才 3 図

ている。さて diagram の各部分を実線一本の切断によつて切離される部分に分割される。切離されぬ部分は点線によつて connected である。才 3 図で D. R. と書いた部分は初期分布から切離せぬ destruction region で、D. F. と書いた部分は状態を k から k につなぐ diagonal fragment に当る。

(11.7) の右辺の摂動展開に現れる diagram で D. F. を一個ももたぬものの部分 and を $\varphi_k[t, f(0)]$ と書く。D. F. を少なくとも一個もつ diagram で、左端の D. F. (才 3 図で vertices P, Q 間の部分) を除いた残りの部分は (11.6) の展開に現われる diagram である。このようなことが言えるためには、散乱中心の数 N_S は無限大 (したがつて系の体積も無限大) でなければならない。かくして (11.7) を平均した式は次の形になる：

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}\right) \overline{f_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}, t)} = \int_0^t ds \mathcal{S}_{\mathbf{k}}(s) \overline{f_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}, t-s)} + \mathcal{D}_{\mathbf{k}}[t, f(0)] . \quad (11.12)$$

ここに

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\mathbf{k}}(t) &\equiv -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} dze^{-izt} i\tilde{\mathcal{S}}_{\mathbf{k}}(z), \\ \frac{1}{i} \tilde{\mathcal{S}}_{\mathbf{k}}(z) &\equiv \sum_{n=1}^{\infty} (-\lambda)^{n+1} \overline{\langle \mathbf{k} | \mathcal{L}_1 \left\{ \frac{1}{\mathcal{L}_0 - z} \mathcal{L}_1 \right\}^n | \mathbf{k} \rangle}^{\text{conn.}} \} \quad (11.13) \end{aligned}$$

は $\partial/\partial \mathbf{p}$ を含む演算子である。記号 conn. は connected diagram のみを拾うことを示す。

二体分布 (11.10) に対応する diagram を作るには、(11.10) に (11.6) を代入した式

$$g_{l,\mathbf{k}}(\mathbf{p}, t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} dze^{-izt} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\alpha=1}^{N_S} e^{i\mathbf{l} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}} \langle \mathbf{k} + \mathbf{l} | \frac{1}{\mathcal{L} - z} | \mathbf{k} \rangle f_{\mathbf{k}'}(\mathbf{p}, 0) \quad (11.14)$$

を摂動展開すればよい。(11.7) の場合と比べると、diagram の左端の vertex $-i\lambda \mathcal{L}_1$ が $\sum_{\alpha} e^{i\mathbf{l} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}}$ で置換えるだけの差であるから、(11.13) の \mathcal{S} の代りに、

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{l,\mathbf{k}}(t) &\equiv -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} dze^{-izt} i\tilde{\mathcal{C}}_{l,\mathbf{k}}(z), \\ \tilde{\mathcal{C}}_{l,\mathbf{k}}(z) &\equiv \sum_{n=1}^{\infty} (-\lambda)^n \sum_{\alpha=1}^{N_S} e^{i\mathbf{l} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}} \overline{\langle \mathbf{k} + \mathbf{l} | \left\{ \frac{1}{\mathcal{L}_0 - z} \mathcal{L}_1 \right\}^n | \mathbf{k} \rangle}^{\text{conn.}} \} \quad (11.15) \end{aligned}$$

が現われる。D.R. のみをもつ diagram の部分和を $\mathcal{D}_{l,\mathbf{k}}[t, f(0)]$ と書くと、次式を得る：

$$g_{l,\mathbf{k}}(\mathbf{p}, t) = \int_0^t ds \mathcal{C}_{l,\mathbf{k}}(s) \overline{f_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}, t-s)} + \mathcal{D}_{l,\mathbf{k}}[t, f(0)] . \quad (11.16)$$

(11.12) と (11.16) が基本方程式である。これらの式の形はオ I 章に述べた damping theory の一般論の式 (4.7) (4.8) と似ている。

§12 Linear-response Solutions (Hydrodynamical Stage)

散乱ポテンシャルが short-range で、bound-state の影響が無視できるとし、また初期分布が空間内のかなりせまい範囲内に粒子が見出されるようなものであれば、前章での議論と同様にして、kinetic stage $t \gg t_0 \sim a/v$ での式が求まる：

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + ik \cdot v\right) \overline{f_k(p, t)} = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \tilde{\mathcal{G}}_k \left(i \frac{\partial}{\partial t} + i\epsilon\right) \overline{f_k(p, t)}, \quad (12.1)$$

$$g_{l,k}(p, t) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \tilde{\mathcal{G}}_{l,k} \left(i \frac{\partial}{\partial t} + i\epsilon\right) \overline{f_k(p, t)}. \quad (12.2)$$

ここまでは別に新しい idea を必要としない。

Hydrodynamical stage では、Introduction に述べた Bogoliubov の idea, 或は Boltzmann 方程式を解く Hilbert-Enskog-Chapman の方法に従えば、 $\overline{f(r, p, t)}$ は流体力学変数を通じてしか時間 t に依存しなくなる。そして流体力学変数は流体力学方程式に従って変動する。今のモデルでは流体力学変数は粒子数密度 $n(r, t)$ とエネルギー密度 $E(r, t)$ 或は local chemical potential $\zeta(r, t)$ と local temperature $T(r, t)$ である。これらの組は熱平衡状態での関数形で相互に結びつくことになる。流体力学方程式は粒子の拡散方程式と熱伝導方程式とである：

$$\frac{\partial n(r, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial r} \cdot j(r, t), \quad \frac{\partial E(r, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial r} \cdot q(r, t) \quad (12.3)$$

Kubo formulae の導出のみが目標であるから、以下では熱力学的な力 — $\partial \mu(r, t) / \partial r$, — $\partial \log T(r, t) / \partial r$ について一次の項まで残す近似で十分である。この場合は次の線型関係式が成立つこととなる：

$$\left. \begin{aligned} j(r, t) &= -L_{DD} \cdot \frac{\partial \zeta(r, t)}{\partial r} - L_{DQ} \cdot \frac{\partial \log T(r, t)}{\partial r}, \\ q(r, t) - \zeta j(r, t) &= -L_{QD} \cdot \frac{\partial \zeta(r, t)}{\partial r} - L_{QQ} \cdot \frac{\partial \log T(r, t)}{\partial r}. \end{aligned} \right\} \quad (12.4)$$

(12.3) と (12.4) とにより流体力学変数の時間依存性が定まる。

線型関係式(12.4)が成立つのは分布関数 \bar{f} が local equilibrium 分布 f^0 から熱力学的な力の斉一次式 f' だけずれる場合である。したがって先づ local equilibrium 分布 f^0 を定める必要があるが、これは kinetic equation (12.1) の衝突項の固有値 0 の解

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} \tilde{\mathcal{G}}_0(i\epsilon) f^0(r, p, t) = 0 \quad (12.5)$$

として定義される。 $\tilde{\mathcal{G}}_k(i\epsilon)$ の k は r -空間では $-i\partial/\partial r$ に対応するから、これを落してある。(12.5) の解を定めるために平衡分布が満す式を調べる。平衡分布としてはハミルトニアン (11.1) の任意の関数でよいが、前章での議論と同様に、以下では Maxwell-Boltzmann 分布を仮定する：

$$f^{\text{eq}}(r, p) = e^{\frac{\zeta - \mathcal{H}(r, p)}{kT}} = \frac{N/V}{(2\pi mkT)^{3/2}} e^{-\mathcal{H}/kT} / \int \frac{dr}{V} e^{-\mathcal{H}/kT} \quad (12.6)$$

これは Liouville 方程式 (11.3) の定常解であるから、その平均値 $\overline{f^{\text{eq}}}$ は kinetic equation (12.1) の定常解である：

$$ik \cdot v \overline{f_k^{\text{eq}}(p)} = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \tilde{\mathcal{G}}_k(i\epsilon) \overline{f_k^{\text{eq}}(p)}. \quad (12.7)$$

この式は $k=0$ とすれば (12.5) と一致する形である。他方 $f_0^{\text{eq}}(p)$ は (12.6) の空間平均すなわち Maxwell 分布であるから、散乱中心の配置には依存しない：

$\overline{f_0^{\text{eq}}(p)} = f_0^{\text{eq}}(p)$ 。故に (12.5) の解は Maxwell 分布である。ただし $\tilde{\mathcal{G}}_0(+i0)$ には時間微分も空間微分も含まれていないから、Maxwell 分布のパラメータを r, t の任意の関数としてよい。これをもう少し便利な形に書くため、(12.6) の平均 $\overline{f^{\text{eq}}(r, p)}$ は r に依存しないことに注意する。これは次のようにして証明される：

$$\begin{aligned} e^{-\beta \lambda U(r)} / \int \frac{dr'}{V} e^{-\beta \lambda U(r')} &= \pi \int \frac{dR_\kappa}{V} \left[\pi e^{-\beta \lambda \phi(r-R_\lambda)} / \int \frac{dr'}{V} \pi e^{-\beta \lambda \phi(r'-R_\mu)} \right] \\ &= \pi \int \frac{dR'_\kappa}{V} \left[\pi e^{-\beta \lambda \phi(R'_\lambda)} / \int \frac{dr'}{V} \pi e^{-\beta \lambda \phi(r'-r+R'_\mu)} \right] \end{aligned}$$

$$= \pi \int_{\kappa} \frac{dR_{\kappa}'}{V} \left\{ \pi e^{-\beta \lambda \phi(R_{\kappa}')} / \int \frac{dr''}{V} \pi e^{-\beta \lambda \phi(r'' + R_{\kappa}')}\right\}.$$

ただし $R_{\kappa}' \equiv r - R_{\kappa}$, $r'' \equiv r' - r$ と置いた。また系の体積 V はポテンシャルの有効領域に比べ十分大きいとしている。したがって $f^{\text{eq}}(r, p)$ は Maxwell 分布に外ならない: $\overline{f^{\text{eq}}(r, p)} = f_0^{\text{eq}}(p)$. Local equilibrium は結局次の形にとればよい:

$$f^0(r, p, t) \equiv \exp\left\{ \frac{\zeta(r, t) - \mathcal{H}(r, p)}{kT(r, t)} \right\}. \quad (12.8)$$

ここに注意しなければならぬことは、平衡分布 (12.6) で規格化条件により化学ポテンシャル ζ は散乱中心の座標に依存することである。上式に於ても

$$\zeta(r, t) = \zeta + \Delta\zeta(r, t), \quad T(r, t) = T + \Delta T(r, t) \quad (12.9)$$

と、(12.6) の ζ, T を使つて書くとき、 $\zeta(r, t)$ は一般に散乱中心の配置に係するが、 $\Delta\zeta(r, t)$, $\Delta T(r, t)$ は熱力学的状態の非一様性を導入する量であるから、これらは散乱中心の分布に依存しないと考へべきものである。Local equilibrium 分布が (12.8) のように $f^{\text{eq}}(r, p)$ の関数形を使つて書けることは、量子論で成立つかなり一般的な定理のように思われるが、証明されていない。線型関係式 (12.4) を得る目的のためには、(12.8) を $\Delta\zeta$, ΔT について展開し、一次の項まで残せばよい:

$$f_k^0(p, t) = \overline{f_0^{\text{eq}}(p)} \left\{ \delta_{k,0} + \frac{[\Delta\zeta(t)]_k}{kT} \right\} + \left[\frac{\mathcal{H}(r, p) - \zeta}{kT} f^{\text{eq}}(r, p) \right]_0 \frac{[\Delta T(t)]_k}{T}. \quad (12.10)$$

ここに $[\dots]_k$ はフーリエ k -成分を示す。

次に (12.1) を解いて、 $\bar{f} = f^0 + f'$ の f' を求めるのであるが、線型関係式を得る近似では問題は quasi-stationary になることに注意する:

$$\partial f(r, p, t) / \partial t = 0. \quad (12.11)$$

先に述べたように hydrodynamical stage では \bar{f} は流体力学的変数 $\zeta(r, t)$

$T(r, t)$ 或は $n(r, t)$, $E(r, t)$ を通じてしか時間 t に依存しない筈であるから $\partial f / \partial t$ は $\partial n / \partial t$, $\partial E / \partial t$ を使つて表わせる。 $\partial n / \partial t$, $\partial E / \partial t$ は流体力学方程式 (12.3) によつて定まる筈で、これはすでに $\partial / \partial r$ について一次であるから、(12.3) の右辺の $j(r, t)$, $q(r, t)$ には local equilibrium の値を使つてよい。Maxwell 分布は p について偶関数であるから、 j 及び q は消える。一般に local equilibrium でこれらの流れが消えることは、local equilibrium という概念に含まれている条件である。

(12.11) を (12.1) に代入すると

$$\{-ik \cdot v + \tilde{\mathcal{G}}_k(+i0)\} \overline{f_k(p, t)} = 0 \quad (12.12)$$

を得るが、勾配 $ik = \partial / \partial r$ について一次まで残せばよいから、

$$\left\{ v + \lim_{k' \rightarrow 0} i \frac{\partial \tilde{\mathcal{G}}_{k'}(+i0)}{\partial k'} \right\} \cdot (-ik) f_k^0(p, t) + \tilde{\mathcal{G}}_0(p, t) f'_k(p, t) = 0. \quad (12.13)$$

ただし (12.5) を使つた。衝突演算子 $\tilde{\mathcal{G}}_k(+i0)$ の k -依存性は普通の Boltzmann 方程式では無視されているが、以下に見るように Kubo formulae の導出に重要な役を演ずる。(11.13) によれば、 $\tilde{\mathcal{G}}_k(z)$ を k について微分するには、その中の一つの propagator $(\mathcal{L}_0 - z)^{-1}$ を $(\mathcal{L}_0 - z)^{-1}(-v)(\mathcal{L}_0 - z)^{-1}$ で置換えたものの和をとればよいことが分かる。これは行列要素 (11.5) から、 $\langle k+l | \mathcal{L}_1 | k+l' \rangle$ は k に依存せず、 $\langle k+l | (\mathcal{L}_0 - z)^{-1} | k+l' \rangle$ は $\delta_{l, l'} \{ (k+l) \cdot v - z \}^{-1}$ と書けるからである。したがつて

$$\lim_{k' \rightarrow 0} i \frac{\partial \tilde{\mathcal{G}}_{k'}(i\epsilon)}{\partial k'} = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \overline{\langle 0 | \{ -\lambda \mathcal{L}_1 \frac{1}{\mathcal{L}_0 - i\epsilon} \}^m v \{ \frac{1}{\mathcal{L}_0 - i\epsilon} (-\lambda \mathcal{L}_1) \}^n | 0 \rangle}^{\text{conn.}} \quad (12.14)$$

(12.13) から $f'_k(p, t)$ を求めるとき、 $\{-\tilde{\mathcal{G}}_0(i\epsilon)\}^{-1}$ を掛けねばならないが、

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{1}{-\tilde{\mathcal{G}}_0(i\epsilon)} = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{-i}{-\frac{1}{i} \tilde{\mathcal{G}}_0(i\epsilon) - i\epsilon} = (-i) \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{0 - i\epsilon} \left\{ \frac{1}{i} \tilde{\mathcal{G}}_0(i\epsilon) \frac{1}{0 - i\epsilon} \right\}^l$$

に注意すると、(12.10) を使つて、 $f'_k(p, t)$ は次の形に求まる：

$$\begin{aligned}
f'_k(p, t) = & \lim_{\epsilon \rightarrow +0} (-i) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{0-i\epsilon} \left\{ \frac{1}{i} \tilde{\mathcal{L}}_0(i\epsilon) \frac{1}{0-i\epsilon} \right\}^l \\
& \cdot \overline{\left[v + \langle 0 | \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ -\lambda \mathcal{L}_1 \frac{1}{\mathcal{L}_0 - i\epsilon} \right\}^m v \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{\mathcal{L}_0 - i\epsilon} (-\lambda \mathcal{L}_1) \right\}^n | 0 \rangle \right]} \text{conn.} \\
& \cdot \left\{ \frac{f_0^{\text{eq}}(p)}{kT} \left[-\frac{\partial \zeta(r, t)}{\partial r} \right]_k + \overline{\left[\frac{\mathcal{H}(r, p) - \zeta}{kT} f^{\text{eq}}(r, p) \right]_0} \left[-\frac{\partial \log T(r, t)}{\partial r} \right]_k \right\}. \quad (12.15)
\end{aligned}$$

ここで前章の最後に述べた熱平衡分布への接近を調べるために使った論法を想起することが必要である。(12.15)の表示の中、(12.14)からきた項で、 v よりも右にある部分を考える。この部分は勿論 v より左側の部分と diagram で connected でなければならぬことは—— conn. の記号で示されている。故に n の和に $n=0$ の項を形式的に入れてもよい。すると—— conn. の中で v の右に入る量は次の形である：

$$F_{k'}(p, i\epsilon) \equiv \sum_{m=0}^{\infty} \langle k' | \left\{ \frac{1}{\mathcal{L}_0 - i\epsilon} (-\lambda \mathcal{L}_1) \right\}^m | 0 \rangle \varphi\left(\frac{p^2}{2m}\right). \quad (12.16)$$

ただし $\varphi(p^2/2m)$ は $f_0^{\text{eq}}(p)$ か $\left[\left\{ \mathcal{H}(r, p) - \zeta \right\} f^{\text{eq}}(r, p) \right]_0$ を表わす。(12.16)は散乱方程式

$$F_{k'}(p, i\epsilon) = \varphi\left(\frac{p^2}{2m}\right) \delta_{k', 0} - \lambda \sum_k \frac{\langle k' | \mathcal{L}_1 | k \rangle}{k' \cdot v - i\epsilon} F_k(p, i\epsilon) \quad (12.17)$$

の解で、 $\lambda \rightarrow 0$ のとき $\varphi(p^2/2m)$ となるものであるから、 $f_k^{\text{eq}}(p)$ か $\left[\left\{ \mathcal{H}(r, p) - \zeta \right\} f^{\text{eq}}(r, p) \right]_k$ でなければならない。かくして (12.15) は次の形に書ける：

$$\begin{aligned}
f'_k(p, t) = & \lim_{\epsilon \rightarrow +0} (-i) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{0-i\epsilon} \left\{ \frac{1}{i} \tilde{\mathcal{L}}_0(i\epsilon) \frac{1}{0-i\epsilon} \right\}^l \\
& \cdot \overline{\left[(v f_0^{\text{eq}}(p) + \sum_{k'} \langle 0 | \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ -\lambda \mathcal{L}_1 \frac{1}{\mathcal{L}_0 - i\epsilon} \right\}^m | k \rangle v f_{k'}^{\text{eq}}(p) \right]} \text{conn.} \\
& \cdot \left[-\frac{\partial \zeta(r, t)}{\partial r} \right]_k + \overline{\left(v \left[\frac{\mathcal{H}(r, p) - \zeta}{kT} f^{\text{eq}}(r, p) \right]_0 \right)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{k'} \overline{\langle 0 | \sum_{m=1}^{\infty} \{-i\mathcal{L}_1 \frac{1}{\mathcal{L}_0 - i\epsilon}\}^m | k' \rangle v \left\{ \frac{\mathcal{H}(r, p) - \zeta}{kT} f^{\text{eq}}(r, p) \right\}_{k'}}^{\text{conn.}} \\
& \cdot \left[-\frac{\partial \log T}{\partial r} \right]_k. \quad (12.18)
\end{aligned}$$

上式で—— conn. の中に入っている量は v の左右が connected となる diagram を捨てることを示す。上式は diagram で表わしてみると、

$$\begin{aligned}
f'_k(p, t) &= \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \sum_{k'} (-i) \overline{\langle 0 | \frac{1}{\mathcal{L} - i\epsilon} | k' \rangle \left\{ v \cdot \frac{[-\partial \zeta(r, t)/\partial r]_k}{kT} + \frac{w - \zeta v}{kT} \right.} \\
& \quad \left. \cdot \left[-\frac{\partial \log T(r, t)}{\partial r} \right]_k \right\} f^{\text{eq}}(r, p) \}_{k'}} \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_0^{\infty} dt' e^{-\epsilon t'} \sum_{k'} \overline{\langle 0 | e^{-i\mathcal{L}t'} | k' \rangle \left\{ v \cdot \frac{[-\partial \zeta/\partial r]_k}{kT} + \dots \right\} f^{\text{eq}}(r, p) \}_{k'}} \\
& \quad (12.19)
\end{aligned}$$

に外ならないことが分かる。

(12.2) の計算も同様に行える。結果だけを記せば、

$$g_{l,k}(p, t) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_0^{\infty} dt' e^{-\epsilon t'} \sum_{k'} \sum_{\alpha=1}^{N_S} e^{it' \cdot R_{\alpha}} \overline{\langle l | e^{-i\mathcal{L}t'} | k' \rangle \left\{ v \cdot \frac{[-\partial \zeta/\partial r]_k}{kT} + \dots \right\} f^{\text{eq}}(r, p) \}_{k'}}.$$

(12.19) (12.20) を (11.8) (11.11) に代入すると、線型関係式 (12.4) が得られることは明らかで、その中に現われる輸送係数テンソルは次の形に求まる：

$$L_{\mu\nu} = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_0^{\infty} dt e^{-\epsilon t} \frac{1}{kT} \iint \frac{dr dp}{V} \overline{f^{\text{eq}}(r, p) J_{\mu} e^{-i\mathcal{L}t} J_{\nu}}, \quad (12.21)$$

ただし

$$J_{\mu} \equiv v \text{ (if } \mu = D), \equiv w - \zeta v \text{ if } (\mu = Q). \quad (12.22)$$

(12.21) は古典論の Kubo formulae に外ならない。

(12.11) のように quasi-stationary にならぬときは、流れ J_{μ} のとり方に修正を要する。例えば気体中では流速 u が流体力学変数に加わるが、 $\partial u / \partial t$

橋爪夏樹

は local equilibrium でも圧力勾配となつて消える。しかしこの場合には圧縮波すなわち音波による流れの部分 J_μ から補正すれば、Kubo formulae は回復される筈である。このことを kinetic approach から証明した論文はない。また磁場下では、量子力学系で、diamagnetic current が生ずるがこれも補正を要する例の一つである。

Note 音波の場合は H. Mori: Prog. Theor. Phys. 28 (1962) 763; 33 (1965) 423 を、反磁性電流の場合は S. Nakajima: Prog. Theor. Phys. 20 (1958) 948 を参照。